

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia merupakan negara yang terletak di garis khatulistiwa dan beriklim tropis. Letak Indonesia yang berada di daerah khatulistiwa memungkinkan untuk terpapar sinar matahari dengan intensitas yang tinggi. Paparan sinar matahari dapat menyebabkan kerusakan pada kulit karena radiasi sinar ultraviolet (UV)¹. Selain itu, perubahan iklim yang diakibatkan oleh pemanasan global dapat menyebabkan semakin tingginya paparan sinar UV. Radiasi sinar UV terdiri dari tiga yang dibedakan berdasarkan panjang gelombangnya yaitu UVA, UVB, dan UVC. Energi UVC tertinggi dan diblokir oleh lapisan ozon. Sinar UVA dan UVB dapat menyebabkan kerusakan DNA oleh oksidasi fotosensitisasi yang menghasilkan radikal².

Akibat begitu besarnya bahaya radiasi sinar UV terutama pada kulit yang terpapar langsung sinar matahari, maka kulit perlu dilindungi meski tubuh telah menyediakan sistem perlindungan alami. Secara umum ada dua cara untuk melindungi kulit dari bahaya radiasi sinar UV yaitu, perlindungan secara fisik, yakni dengan memakai payung, topi lebar, baju lengan panjang, celana lengan panjang, dan lain sebagainya. Selain itu, dapat dilakukan perlindungan secara kimiawi dengan mengoleskan produk-produk perlindungan dari sinar matahari langsung pada kulit seperti penggunaan tabir surya (*sunscreen*) pada kulit. Tabir surya berperan sebagai filter sinar UV³.

Filter ultraviolet dapat diklasifikasikan menjadi filter UV anorganik dan filter UV organik, yang memantulkan, menyebarkan dan menyerap radiasi UV. Hanya ada dua filter UV anorganik yang saat ini disetujui: seng oksida (ZnO) dan titanium dioksida (TiO₂)⁴. Namun, aktivitas fotokatalitik yang kuat dan indeks bias yang tinggi telah membatasi perkembangan filter UV anorganik⁵. Filter UV organik mencakup berbagai jenis senyawa organik, yang paling umum adalah sinamat, dibenzoyl metan dan benzofenon^{6,7}. Senyawa ini memiliki satu atau beberapa cincin benzen, memungkinkan delokalisasi elektron π yang berkelanjutan, molekul ini mampu menyerap sinar UV⁸, tetapi filter UV organik menjadi tidak efektif karena bisa mengalami fotodegradasi oleh paparan sinar matahari secara terus menerus^{9,10,11}.

Avobenzon, merupakan salah satu senyawa organik sebagai filter UV A pada tabir surya^{12,13} mempunyai bentuk-diketo sebagai konfigurasinya (Gambar 2.1). Setelah iradiasi bentuk diketo sebagian besar menghasilkan radikal seperti

arylglyoxals dan benzil yang kehilangan efisiensi perlindungan UVA dan menyebabkan kerusakan pada kulit manusia¹⁴. Selain itu, ketersediaan avobenzon terbatas karena kelarutannya yang buruk dalam air. Salah satu metode untuk mengatasi masalah ini adalah penggunaan pelarut organik^{15,16,17}. Namun, pelarut organik dapat menyebabkan *photoaging* yang berakibat pada masalah kesehatan kulit. Strategi lain adalah dengan memodifikasi struktur dari avobenzon tersebut. Modifikasi dilakukan dengan penambahan gugus mendorong dan penarik elektron yang berguna untuk meningkatkan fotostabilitas dari senyawa avobenzon.

Studi komputasi merupakan bidang ilmu yang mempelajari tentang penyusunan model matematika dan teknik penyelesaian numerik serta penggunaan komputer untuk menganalisis dan memecahkan masalah-masalah ilmu (sains). Studi komputasi beberapa tahun belakang menarik minat para peneliti karena pendekatan studi komputasi dapat memberikan berbagai pemahaman baru, melalui penerapan model-model matematika dalam program komputer berdasarkan landasan teori yang telah berkembang, untuk menyelesaikan masalah-masalah nyata dalam ilmu tersebut. Selain itu studi komputasi juga dapat digunakan untuk menjelajahi mekanisme reaksi dan menjelaskan pengamatan pada reaksi di laboratorium¹⁸. Beberapa studi komputasi tentang *sunscreen* adalah Analisis Spektra Transisi Elektronik Senyawa Tabir Surya MAA'S-GLY Pada Konfigurasi Dimer Dan Konfigurasi Solut-Etanol, Studi Komputasi Senyawa Turunan Eugenol Dan Safrol Sebagai Bahan Aktif Tabir Surya Menggunakan Metode Semiempiris PM3, *Semi empirical Study on Electronical Transition Spectra of Ethyl Pmethoxycinnamate (EPMS) From Kencur (Kaempferia Galanga) For Sunscreen Component*.

Berdasarkan uraian diatas maka penulis tertarik untuk melakukan penelitian teoritik secara komputasi tentang modifikasi Struktur Avobenzon Untuk Meningkatkan Stabilitasnya Sebagai Sunscreen menggunakan metode perhitungan DFT (*Density Functional Theory*). Metode ini dipilih karena hasil perhitungannya yang akurat mendekati hasil eksperimen.

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana fotostabilitas avobenzon dalam bentuk tautomer keto dan enol
2. Bagaimana efek pelarut etanol terhadap kestabilan avobenzon keto-enol
3. Bagaimana pengaruh penambahan gugus pendorong dan penarik elektron terhadap stabilitas avobenzon

1.3 Tujuan Penelitian

1. Mempelajari fotostabilitas avobenzon dalam bentuk tautomer keto dan enol
2. Mengetahui bagaimana efek pelarut etanol terhadap kestabilan avobenzon keto-enol
3. Mengetahui pengaruh penambahan gugus pendorong dan penarik elektron terhadap stabilitas avobenzon

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan sumbangan informasi dan manfaat terhadap bidang ilmu kimia terutama farmakologi, serta kimia organik bahan alam, bagaimana struktur senyawa avobenzon yang terbaik sebagai filter UV A sehingga nantinya dapat disintesis secara eksperimen di laboratorium.

